View metadata, citation and similar papers at core.ac.uk
brought to you by CORE
provided by Electronic National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute"...

ТОПОЛОГІЧНИЙ АНАЛІЗ СТРУКТУРИ МОНОМЕРІВ ПРИ СИНТЕЗІ ФУРАНО-ЕПОКСИДНИХ ПОЛІМЕРІВ

Рассоха О.М.
Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків

Топологічний аналіз за допомогою методів теорії графів дозволяє проводити ефективну оцінку реакційної здатності мономерів та процесу формування раціональної структури фурано–епоксидних полімерних систем.

Об'єктами дослідження були вибрані наступні вихідні речовини (мономери): 3–бутен–2–он–4–(2–фуріл) — монофурфуріліденацетон МФА, 1,5–біс(2-фуріл)пента–1,4–дієн–3–он — діфурфуріліденацетон ДІФА, дігліцедиловий ефір бісфенолу А – діфенілолпропан (ДГЕБА) — (випускається промисловістю під марками ЭД–24, DER–330, Epikote 827, Rutapox 0162, Епон–826, Епірез–510 та інш.), етилендіамін (ЕДА), діетилентріамін (ДЕТА), триетилентетрамін (ТЕТА), 1–[[(2 аміноетил)аміно]метил]фенол — (етилендіамінометилфенол) марки Агідол АФ–2, моноцианетилдіетилентриамін УП–0633М — продукт конденсації нітрилу акрилової кислоти з ДЕТА (марка А) та ТЕТА (марка Б), діцианетилдіетилентриамін УП–0633, *м*–фенілендіамін (*м*–ФДА) .

Молекулярну структуру вихідних речовин (мономерів), що приймають участь в хімічних реакціях синтезу фурано–епоксидних полімерів доцільно описувати в термінах теорії графів за допомогою простого ациклічного зв'язанного графу, вершинами якого є атоми мономеру, а ребрами графу–зв'язки між цими атомами. Кількість ребер простого графу T (хімічних зв'язків) визначається числом його вершин A (кількість атомів всіх видів a_i у бруто–формулі мономера). В роботі визначено кількість валентностей в молекулі мономеру N, загальне число валентностей N, що приймають участь в утворенні одного зв'язку (ребра графу), кількість "надлишку" валентностей, які не приймають участь у формуванні насиченої молекулярної структури N_c. Цей "надлишок" характеризує формальну ненасиченість досліджених мономерів (formal unsaturation) fu та використовується на утворення кратних (подвійних, потрійних) зв'язків, нестійких циклів, які в подальшому приймають участь у формуванні міжланцюгового зв'язку при синтезі фурано–епоксидних полімерів. Її можна оцінити згідно з формулою:

$$fu = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} a_i \left(N_i - 2 \right) + 2}{2}, \text{ где } fu = 0,1,2,3...$$

Для дослідження структури та реакційної здатності мономерів були визначені топологічні індекси (структурні дескриптори) Вінера (традиційний та модифікований) та індекси зв'язності Рандича, які містять інформацію про розмір, форму молекули, характер з'єднання атомів та груп, їх геометричне розташування тощо.